

University of Groningen

Iodine charge-transfer salts of benzene-bridged bis(1,2,3,5- diselenadiazolyl) diradicals. Electrocrystallization and solid- state characterization of 1,3- and 1,4- [(Se₂N₂C)C₆H₄(CN₂Se₂)]⁺[I⁻]

Bryan, C.D.; Cordes, A.W.; George, N.A.; Haddon, R.C.; MacKinnon, C.D.; Oakley, R.T.; Palstra, T.T.M.; Perel, A.S.

Published in:
Chemistry of Materials

DOI:
[10.1021/cm950446s](https://doi.org/10.1021/cm950446s)

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version
Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:
1996

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Bryan, C. D., Cordes, A. W., George, N. A., Haddon, R. C., MacKinnon, C. D., Oakley, R. T., Palstra, T. T. M., & Perel, A. S. (1996). Iodine charge-transfer salts of benzene-bridged bis(1,2,3,5- diselenadiazolyl) diradicals. Electrocrystallization and solid- state characterization of 1,3- and 1,4- [(Se₂N₂C)C₆H₄(CN₂Se₂)]⁺[I⁻]. *Chemistry of Materials*, 8(3), 762 - 768. <https://doi.org/10.1021/cm950446s>

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

I-768-m1

Table S1 Crystal and refinement data.

Compound	[1,4-Se][I]	[1,3-Se][I]	[1,4-Se][I][I ₃]
formula	ISe ₄ N ₄ C ₈ H ₄	ISe ₄ N ₄ C ₈ H ₄	I ₄ Se ₄ N ₄ C ₈ H ₄
fw	598.88	598.88	979.59
crystal size, mm	0.13 x 0.10 x 0.44	0.03 x 0.05 x 0.38	0.24 x 0.14 x 0.10
crystal color	very dark brown	black	golden brown
crystal mount	on fiber with silicone rubber	on fiber with silicone rubber	on fiber with silicone rubber
<i>a</i> , Å	10.586(2)	28.489(7)	12.862(3)
<i>b</i> , Å	16.713(2)	3.543(2)	15.063(2)
<i>c</i> , Å	3.5006(14)	12.283(2)	9.028(3)
β , deg	104.26(2)	---	100.62(2)
<i>V</i> , Å ³	600.2(3)	1239.8(8)	1719.1(7)
cell detn, refls	25	25	25
cell detn, 2 θ range, deg	20-25	20-22	20-25
<i>d</i> (calcd), g cm ⁻³	3.314	3.21	3.785
space group	C2/m	Ima2	C2/c
<i>Z</i>	2	4	4
<i>F</i> ₀₀₀	535.83	1071.7	1699.33
radiation	MoK α , graphite monochromated	MoK α , graphite monochromated	MoK α , graphite monochromated
λ , Å	0.71073	0.71073	0.71073
temp, K	293	293	293
linear abs coeff, mm ⁻¹	14.63	14.2	15.56
diffractometer	Enraf-Nonius CAD-4	Enraf-Nonius CAD-4	Enraf-Nonius CAD-4
scan technique	θ - 2 θ	θ - 2 θ	θ - 2 θ
scan speed, deg min ⁻¹	4-16 (in omega)	4-16 (in omega)	4-16 (in omega)
scan width, deg	1.0 + 0.35tan θ	1.0 + 0.35tan θ	1.0 + 0.35tan θ
2 θ range, deg	4-50	4-50	4-50

I-768-m2

h, k, l ranges	-12,12; -19,19; -4,0	0,33; 0,4; -14,14	-15,15; -17,17; -10,0
exposure time, hrs	14.2	13.5	35.9
std refl indices	5,-5,-1; 2,8,-1; -3,-5,-1	11,1,2; 6,0,6; 0,0,6	-3,-3,-3; -3,3,-3; -4,0,-4
drift of stds, %	2.2	1.9	3.1
absorption correction	empirical psi scans	analytical	empirical psi scans
absorption, range	0.57-1.00	0.49-0.68	0.71-1.00
refl meas	1193	1124	3149
unique refls	551	594	1510
R for merge	0.050	0.05	0.048
data with I > 3σ(I)	448	387	769
solution method	Direct Methods	Direct Methods	Direct Methods
parameters refined	48	56	95
R(F), R _w (F) ^a	0.028, 0.045	0.047, 0.061	0.059, 0.075
GOF	0.84	1.02	1.20
p, w ⁻¹ = [σ ² (I) + pI ²]/4F ²	0.05	0.05	0.05
largest Δ/σ	0.001	0.000	0.001
extinction correction	none	none	none
final diff map, e Å ⁻³	-0.6(1), +0.8(1)	-1.0(2), +1.2(2)	-1.1(4), +2.0(4)
programs	NRC386 ^b	NRC386 ^b	NRC386 ^b
H atom treatment	Idealized positions (C-H = 0.95Å)	Idealized positions (C-H = 0.95Å)	Idealized positions (C-H = 0.95Å)

Notes and footnotes

^aR = $[\Sigma ||F_o| - |F_c||]/[\Sigma |F_o|]$; R_w = $\{[\Sigma w||F_o| - |F_c||^2]/[\Sigma (w|F_o|^2)]\}^{1/2}$

^bNRC386 (PC version of NRCVAX), an interactive program system for structure analysis; see E.J. Gabe, Y. LePage, J.P. Charland, F.L. Lee, and P.S. White, *J. Appl. Cryst.* **22**, 383 (1989).

Scattering factors were taken from the International Tables for Crystallography, Volume 4.

Table S2 Interatomic distances (Å) and angles (deg). ESDs refer to the last digit printed.**[1,4-Se] [I]**

Distances		Angles	
Se-Se'	2.3050 (11)	Se-Se'-N	91.34 (13)
Se-N	1.778 (6)	Se-N-C1	116.1 (4)
N-C1	1.346 (6)	N-C1-N'	125.1 (7)
C1-C2	1.462 (11)	N-C1-C2	117.5 (4)
C2-C3	1.399 (7)	C1-C2-C3	122.1 (4)
C3-C3'	1.341 (13)	C3-C2-C3'	115.9 (6)
		C2-C3-C3'	122.1 (5)

[1,3-Se] [I]

Distances		Angles	
I1-I2	0.53 (6)	Se2-Se1-N1	90.7 (7)
I1-I2'	3.01 (6)	Se1-Se2-N2	91.8 (7)
Se1-Se2	2.316 (6)	Se1-N1-C1	115.4 (15)
Se1-N1	1.770 (19)	Se2-N2-C1	114.6 (17)
Se2-N2	1.758 (21)	N1-C1-N2	127.4 (21)
N1-C1	1.33 (3)	N1-C1-C2	113.5 (18)
N2-C1	1.34 (3)	N2-C1-C2	119.0 (19)
C1-C2	1.51 (3)	C1-C2-C3	117.8 (20)
C2-C3	1.39 (3)	C1-C2-C5	123.2 (20)
C2-C5	1.35 (3)	C3-C2-C5	119.0 (22)
C3-C4	1.36 (3)	C2-C3-C4	119.8 (23)
		C3-C4-C3'	120 (3)
		C2-C5-C2'	121 (3)

[1,4-Se] [I] [I₃]

Distances		Angles (deg)	
Se1-Se2	2.278 (3)	Se2-Se1-N1	91.6 (6)
Se1-N1	1.766 (17)	Se1-Se2-N2	91.1 (5)
Se2-N2	1.748 (15)	Se1-N1-C1	116.4 (14)
N1-C1	1.37 (3)	Se2-N2-C1	118.7 (13)
N2-C1	1.33 (3)	N1-C1-N2	122.1 (17)
C1-C2	1.483 (25)	N1-C1-C2	119.3 (17)
C2-C3	1.366 (24)	N2-C1-C2	118.5 (17)
C2-C4	1.391 (24)	C1-C2-C3	119.0 (16)
C3-C3'	1.38 (3)	C1-C2-C4	120.1 (16)
C4-C4'	1.34 (3)	C3-C2-C4	120.8 (15)
		C2-C3-C3'	119.2 (16)
		C2-C4-C4'	119.6 (16)

Table S3 Anisotropic thermal parameters $u(i,j)*100$. ESDs refer to the last digit printed.**[1,4-Se] [I]**

Atom	u11 (U)	u22	u33	u12	u13	u23
I1	2.9 (5)	1.2 (6)	25.3 (25)	0.0	-4.0 (6)	0.0
I2	4.5 (3)	1.8 (4)	9.9 (4)	0.0	2.0 (4)	0.0
Se	2.47 (4)	2.37 (4)	5.78 (5)	-0.186 (20)	0.33 (3)	-0.19 (3)
N	2.56 (25)	2.45 (25)	4.7 (3)	-0.24 (20)	0.48 (23)	-0.29 (23)
C1	3.2 (4)	2.7 (4)	3.5 (5)	0.0	1.1 (4)	0.0
C2	2.8 (4)	2.3 (4)	2.5 (4)	0.0	0.5 (3)	0.0
C3	2.1 (3)	3.5 (3)	3.1 (3)	0.72 (22)	-0.13 (22)	0.0 (3)

[1,3-Se] [I]

Atom	u11	u22	u33	u12	u13	u23
I1	3.1 (10)	24.7 (65)	2.2 (7)	-4.7 (11)	0.0 (0)	0.0 (0)
I2	2.8 (10)	15.3 (14)	7.1 (13)	-1.3 (12)	-1.1 (5)	1.6 (7)
Se1	3.70 (12)	5.44 (17)	2.74 (11)	0.05 (14)	0.33 (11)	-0.31 (24)
Se2	3.43 (13)	5.81 (19)	3.83 (14)	0.24 (15)	0.70 (12)	-0.06 (24)

[1,4-Se] [I] [I₃]

Atom	u11 (U)	u22	u33	u12	u13	u23
I1	3.48 (11)	5.75 (15)	5.02 (14)	0.0	1.71 (10)	0.0
I2	9.3 (23)	5.5 (10)	6.8 (29)	0.2 (13)	-1.6 (13)	-1.7 (17)
I3	32.7 (57)	4.2 (6)	5.7 (18)	-3.0 (11)	-10.8 (30)	1.5 (8)
I4	18.3 (28)	7.9 (10)	4.9 (21)	0.0	-9.2 (24)	0.0
I5	35.5 (46)	9.2 (16)	10.8 (20)	-8.4 (23)	3.9 (19)	2.5 (13)
I6	14.1 (28)	3.3 (7)	4.2 (17)	-1.2 (13)	-2.8 (12)	0.7 (11)
I7	22.4 (35)	6.2 (8)	2.1 (10)	-2.7 (15)	-0.8 (12)	1.7 (7)
Se1	5.88 (17)	3.23 (13)	5.90 (17)	-0.62 (11)	3.49 (14)	-0.73 (11)
Se2	3.71 (12)	3.50 (12)	4.47 (14)	-0.94 (10)	1.33 (10)	0.07 (10)

Anisotropic temperature factors are of the form:

$$\exp[-2\pi^2(h^2U_{11}a^{*2} + k^2U_{22}b^{*2} + l^2U_{33}c^{*2} + 2hkU_{12}a^{*}b^{*} + 2hlU_{13}a^{*}c^{*} + 2klU_{23}b^{*}c^{*})].$$

Table S4 Summary of intermolecular Se..Se, Se..N, Se..I, and I..I contacts (Å).**[1,4-Se] [I]**

Se-Se	3.7769(12)	(at 1.5-x, 0.5-y, 1-z)
Se-N	3.069(4)	(at 1.5-x, 0.5-y, 1-z)
Se-I1	3.7077(8)	
Se-I1	3.7484(7)	(at x, y, z-1)
Se-I2	3.915(7)	
Se-I2	3.588(2)	(at x, y, z-1)
Se-I2	3.533(6)	(at 2-x, -y, 2-z)
Se-I2	3.942(4)	(at 2-x, -y, 1-z)
I1-I2	3.107(9)	(at x, y, z-1)

[1,3-Se] [I]

I1-Se1	4.085(3)	(at -0.5+x, 0.5+y, -0.5+z)
I1-Se1	3.497(3)	(at -0.5+x, -0.500+y, -0.5+z)
I1-Se2	4.321(4)	(at -0.5+x, 0.500+y, -0.5+z)
I1-Se2	3.824(4)	(at -0.5+x, -0.500+y, -0.5+z)
I1-Se2	3.743(4)	(at 1.5-x, y, z)
I2-Se1	3.80(3)	(at -0.5+x, 0.5+y, -0.5+z)
I2-Se1	3.71(3)	(at -0.5+x, -0.5+y, -0.5+z)
I2-Se1	3.361(11)	(at 1.5-x, 0.5-y, -0.5+z)
I2-Se2	4.06(3)	(at -0.5+x, 0.5+y, -0.5+z)
I2-Se2	4.02(3)	(at -0.5+x, -0.5+y, -0.5+z)
I2-Se2	3.699(4)	(at 1.5-x, y, z)
I2-Se2	3.861(17)	(at -0.5+x, -y, z)
I2-Se2	3.691(11)	(at 1.5-x, 0.5-y, -0.5+z)

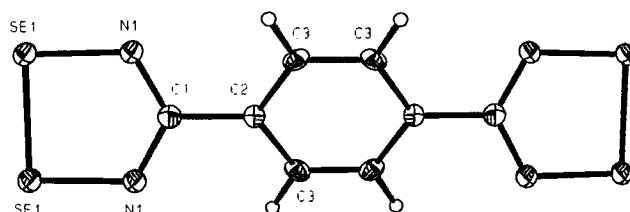
[1,4-Se] [I] [I₃]

Se1-Se1	3.841(4)	(at 1.5-x, 0.5-y, -z)
Se1-I3	3.76(3)	(at 0.5-x, 0.5-y, -z)
Se1-I4	3.775(8)	(at 0.5-x, 0.5-y, -z)
Se1-I6	3.710(15)	(at 1-x, y, 0.5-z)
Se1-I7	3.524(22)	(at 1-x, y, 0.5-z)
Se2-I1	3.3574(25)	(at 1-x, -y, -z)
Se2-I2	3.7929(23)	(at 0.5+x, -0.5+y, z)
Se2-I5	3.65(3)	(at 0.5+x, -0.5+y, z)
Se2-I6	3.536(14)	(at 0.5+x, -0.5+y, z)
Se2-I7	3.559(22)	(at 0.5+x, -0.5+y, z)
I2-I3	3.29(4)	
I5-I5	3.21(12)	(at -x, y, 0.5-z)

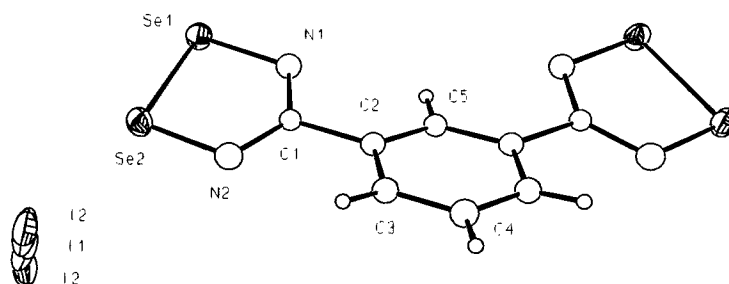
I-768-m6

Figure S1 ORTEP drawings of molecular units in [1,4-Se] [I] and [1,3-Se] [I].

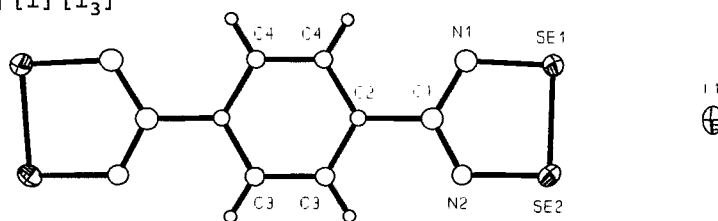
1. [1,4-Se] [I]



2. [1,3-Se] [I]



3. [1,4-Se] [I] [I₃]



I-768-m7

Page 1

Table F1 Observed and calculated structure factor amplitudes for [1,4-Se][I]

Columns are 10Fo				10Fc				100Sig, * for Insignificant							
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
h, 0, 0				3	778	793	59	5	300	307	65	2	232	237	46
2 1766 1814 38				5	746	755	48	7	360	345	59	4	779	737	77
4 1451 1489 55				7	403	396	38	h, 16, 0				6	266	256	67
6 203 159 58				9	199	192	81	0 1230 1197 117				8	896	895	76
8 1683 1702 85				11	219	217	81	2 515 499 46				10	350	351	82
10 1108 1117 105				h, 8, 0				4 346 335 59				h, 3, 1			
12 222 231 115				0 1595 1446 74				6 43 22 532*				-11 482 510 63			
h, 1, 0				2 280 291 40				h, 17, 0				-9 962 996 92			
1 1026 1049 24				4 2038 2087 62				1 892 901 62				-7 55 73 484*			
3 447 431 32				6 994 1014 73				3 26 39 1483*				-5 1091 1100 65			
5 89 82 69				8 568 578 47				5 223 212 91				-3 341 334 34			
7 475 464 41				10 351 385 62				h, 18, 0				-1 2119 2199 57			
9 549 557 47				h, 9, 0				0 26 27 2168*				1 976 994 63			
11 188 193 84				1 79 47 139*				2 295 300 71				3 1024 974 70			
h, 2, 0				3 1133 1122 65				4 572 588 58				5 576 549 59			
0 859 805 38				5 1230 1256 70				h, 19, 0				7 882 875 72			
2 640 629 37				7 291 286 49				1 221 226 92				9 812 830 85			
4 1979 2063 45				9 155 158 111				3 709 709 60				h, 4, 1			
6 990 1028 59				h, 10, 0				h, 0, 1				-12 156 150 140			
8 308 309 42				0 1663 1604 84				-12 171 161 173				-10 216 202 87			
10 148 153 105				2 788 766 46				-10 842 870 102				-8 309 317 56			
12 443 435 51				4 230 218 53				-8 438 433 63				-6 487 497 50			
h, 3, 0				6 186 179 68				-6 1613 1699 95				-4 566 582 49			
1 594 593 38				8 753 773 66				-4 1739 1835 79				-2 494 501 48			
3 1912 1963 42				10 487 466 49				-2 1532 1492 67				0 550 566 54			
5 2128 2208 52				h, 11, 0				0 2156 2152 72				2 717 704 72			
7 268 272 41				1 1726 1694 72				2 1149 1141 85				4 549 526 62			
9 596 603 53				3 348 334 48				4 2159 2167 99				6 273 284 71			
11 174 154 91				5 827 834 58				6 65 147 332*				8 224 229 100			
h, 4, 0				7 507 495 46				8 1052 1036 145				10 217 231 124			
0 1075 1003 53				9 977 1007 69				10 153 137 223				h, 5, 1			
2 741 727 45				h, 12, 0				h, 1, 1				-11 119 130 219*			
4 435 455 39				0 727 712 73				-11 133 129 139				-9 426 434 54			
6 437 452 39				2 689 676 50				-9 22 28 834*				-7 458 482 50			
8 378 385 40				4 562 557 48				-7 435 445 47				-5 1400 1444 70			
10 219 225 69				6 414 411 45				-5 946 996 64				-3 580 590 49			
h, 5, 0				8 330 339 58				-3 890 919 54				-1 752 753 72			
1 2036 2026 45				h, 13, 0				-1 427 420 43				1 106 80 97			
3 125 99 48				1 198 190 70				1 357 342 37				3 1309 1310 75			
5 445 461 38				3 844 852 62				3 947 926 67				5 996 1009 90			
7 653 643 53				5 953 997 64				5 838 810 84				7 244 220 84			
9 1023 1054 82				7 112 134 191*				7 198 202 93				9 373 369 77			
11 286 284 62				9 259 250 76				9 25 28 1905*				h, 6, 1			
h, 6, 0				h, 14, 0				11 193 187 146				-10 389 407 63			
0 2488 2423 63				0 500 481 59				h, 2, 1				-8 122 114 128			
2 1050 1037 51				2 291 285 55				-12 27 1 993*				-6 1143 1166 79			
4 631 632 47				4 1145 1184 91				-10 742 752 74				-4 1236 1274 70			
6 19 33 1022*				6 661 673 53				-8 700 739 63				-2 284 265 45			
8 1004 1047 78				8 232 216 82				-6 380 399 41				0 747 748 65			
10 681 701 57				h, 15, 0				-4 519 523 46				2 794 797 79			
h, 7, 0				1 556 569 44				-2 1217 1249 51				4 1478 1471 82			
1 813 740 51				3 389 397 51				0 1977 2017 57				6 322 321 66			

I-768-m8

Page 2

Columns are 10Fo				10Fc				100Sig, * for Insignificant							
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
h, 6, 1				-7	571	575	56	4	838	835	84	-11	364	353	71
8 471 456 64				-5	1516	1541	94	h, 17, 1				-9	280	282	73
10 34 24 988*				-3	517	518	57	-5	705	709	76	-7	671	673	68
h, 7, 1				-1	882	874	71	-3	282	275	98	-5	913	913	79
-11 188 162 115				1	98	44	183*	-1	329	335	87	-3	316	300	48
-9 320 309 66				3	1518	1475	101	1	26	12	1282*	-1	825	870	77
-7 217 229 74				5	1020	1025	79	3	669	662	73	1	269	258	65
-5 185 183 73				7	298	295	95	h, 18, 1				3	1063	1039	91
-3 345 358 43				h, 12, 1				-4	27	20	2081*	5	290	269	75
-1 500 526 53				-10	53	65	1476*	-2	410	404	82	7	486	501	64
1 488 490 50				-8	100	100	209*	0	503	489	72	9	160	179	215
3 211 211 74				-6	185	189	105	2	103	110	269*	h, 4, 2			
5 195 183 91				-4	272	273	76	h, 19, 1				-10	25	14	1656*
7 299 301 78				-2	267	259	80	-1	830	840	83	-8	23	18	1539*
9 248 237 106				0	185	164	145	1	424	446	88	-6	63	12	219*
h, 8, 1				2	149	137	131	h, 0, 2				-4	90	67	136
-10 935 934 79				4	235	238	96	-12	293	281	121	-2	99	66	169*
-8 737 743 73				6	265	250	98	-10	860	841	104	0	62	53	336*
-6 626 636 61				8	124	109	276*	-8	150	127	144	2	123	72	129
-4 613 597 62				h, 13, 1				-6	998	995	114	4	86	51	199*
-2 1558 1542 78				-9	602	605	67	-4	108	118	161	6	24	79	2094*
0 2027 2043 81				-7	183	177	116	-2	1653	1646	94	8	27	4	1993*
2 18 23 1030*				-5	351	355	69	0	1067	1024	111	h, 5, 2			
4 944 936 96				-3	234	229	90	2	797	805	88	-11	390	369	69
6 343 321 68				-1	1098	1111	105	4	718	733	103	-9	410	418	59
8 1119 1117 117				1	704	707	74	6	600	614	87	-7	320	312	59
10 364 382 93				3	235	235	100	8	788	780	131	-5	585	585	59
h, 9, 1				5	162	153	145	h, 1, 2				-3	368	356	49
-11 267 259 94				7	514	498	71	-11	133	132	153	-1	926	936	97
-9 573 596 66				h, 14, 1				-9	219	218	82	1	116	109	141
-7 100 131 210*				-8	395	392	78	-7	147	129	96	3	645	660	68
-5 413 421 53				-6	307	314	85	-5	387	390	44	5	152	157	131
-3 177 184 84				-4	209	214	106	-3	76	53	182*	7	506	506	66
-1 1135 1141 86				-2	837	812	82	-1	414	419	52	h, 6, 2			
1 739 749 69				0	1046	1049	94	1	91	105	156*	-10	501	497	59
3 305 293 65				2	23	57	1246*	3	367	365	57	-8	23	67	1721*
5 217 209 95				4	448	440	73	5	200	198	99	-6	614	629	59
7 457 467 65				6	230	202	119	7	189	168	121	-4	224	218	72
9 476 481 75				h, 15, 1				9	126	168	218*	-2	809	822	78
h, 10, 1				-7	183	190	137	h, 2, 2				0	605	611	60
-10 195 204 118				-5	263	265	99	-12	28	13	1024*	2	461	487	55
-8 24 100 1744*				-3	210	197	111	-10	441	441	59	4	511	531	56
-6 711 728 72				-1	180	153	127	-8	22	50	878*	6	269	261	92
-4 890 905 92				1	241	246	105	-6	782	801	59	8	455	454	76
-2 19 53 800*				3	324	308	91	-4	510	512	54	h, 7, 2			
0 404 403 55				5	174	180	155	-2	689	707	55	-11	57	12	379*
2 530 531 54				h, 16, 1				0	641	638	66	-9	25	12	935*
4 951 956 85				-6	634	652	68	2	603	588	69	-7	139	149	121
6 217 234 108				-4	737	735	76	4	707	719	75	-5	211	206	79
8 232 246 122				-2	126	105	228*	6	129	135	200	-3	133	84	156
h, 11, 1				0	364	360	80	8	411	407	78	-1	31	40	625*
-9 455 453 65				2	450	443	75	h, 3, 2				1	107	94	208*

Columns are 10Fo				10Fc	100Sig, *	for Insignificant									
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 7, 2			6	81	14	445*	-6	493	495	53	-8	188	163	149
3	220	207	95		h, 13, 2			-4	75	66	281*	-6	446	435	64
5	91	105	229*	-7	209	235	122	-2	479	487	55	-4	73	84	294*
7	26	18	1974*	-5	476	473	66	0	159	133	130	-2	531	544	68
	h, 8, 2			-3	119	118	227*	2	457	454	64	0	97	94	257*
-10	561	541	60	-1	517	542	66	4	301	281	89	2	427	459	80
-8	24	3	1575*	1	25	35	2284*	6	201	206	138	4	194	181	146
-6	875	871	70	3	492	480	73		h, 3, 3				h, 9, 3		
-4	293	303	67	5	175	172	160	-9	26	14	1716*	-7	280	282	93
-2	952	964	83		h, 14, 2			-7	449	458	58	-5	303	280	83
0	616	621	69	-6	493	474	68	-5	306	308	68	-3	128	134	238*
2	685	696	72	-4	175	159	136	-3	296	304	71	-1	244	232	116
4	676	700	76	-2	449	452	72	-1	302	288	88	1	156	158	217
6	330	324	81	0	271	268	99	1	331	340	78	3	323	327	97
8	519	521	100	2	382	393	85	3	467	458	67		h, 10, 3		
	h, 9, 2			4	367	380	95	5	27	45	2139*	-8	140	33	207
-9	211	194	103		h, 15, 2				h, 4, 3			-6	230	250	111
-7	318	324	70	-5	66	73	846*	-10	27	25	1790*	-4	66	45	482*
-5	588	588	60	-3	162	140	155	-8	25	22	960*	-2	372	388	88
-3	21	16	1139*	-1	124	102	203	-6	77	25	229*	0	183	148	188
-1	468	490	61	1	26	6	1318*	-4	23	43	1655*	2	243	229	121
1	91	39	267*	3	27	28	2293*	-2	101	13	252*		h, 11, 3		
3	562	575	58		h, 16, 2			0	23	56	2249*	-7	377	351	83
5	257	256	99	-4	168	160	160	2	24	7	2037*	-5	225	220	118
7	215	208	129	-2	435	438	80	4	60	49	906*	-3	316	315	97
	h, 10, 2			0	362	345	91		h, 5, 3			-1	297	301	104
-10	347	368	85	2	276	275	115	-9	135	128	197	1	217	255	146
-8	67	140	398*		h, 17, 2			-7	300	278	74		h, 12, 3		
-6	375	384	66	-3	157	186	235	-5	161	198	127	-6	28	25	1147*
-4	178	173	108	-1	412	440	86	-3	358	364	67	-4	56	42	976*
-2	535	558	58		h, 0, 3			-1	426	439	75	-2	142	150	198
0	482	477	62	-10	423	395	93	1	135	124	171	0	174	177	169
2	250	262	95	-8	178	143	150	3	336	338	85		h, 13, 3		
4	333	331	82	-6	439	434	80	5	79	61	712*	-5	47	201	2100*
6	221	194	116	-4	290	282	95		h, 6, 3			-3	186	197	158
	h, 11, 2			-2	824	836	98	-8	121	107	219*	-1	254	281	128
-9	327	314	83	0	216	204	148	-6	337	341	71		h, 0, 4		
-7	484	471	61	2	486	490	86	-4	108	75	219*	-6	154	132	215
-5	673	667	76	4	79	113	427*	-2	489	486	65	-4	178	183	178
-3	339	337	73	6	464	448	105	0	24	129	2393*	-2	247	263	175
-1	818	833	83		h, 1, 3			2	337	343	84	0	28	50	3180*
1	108	121	205*	-9	40	76	497*	4	176	166	143		h, 1, 4		
3	775	801	82	-7	193	179	99		h, 7, 3			-5	103	110	211*
5	142	153	171	-5	211	221	86	-9	80	26	590*	-3	71	57	396*
	h, 12, 2			-3	128	116	128	-7	26	108	1815*	-1	41	27	831*
-8	154	149	150	-1	255	247	94	-5	39	108	633*		h, 2, 4		
-6	117	82	241*	1	49	64	928*	-3	67	15	420*	-6	152	159	157
-4	24	47	1888*	3	256	255	97	-1	94	10	340*	-4	99	133	237*
-2	175	151	128	5	55	66	567*	1	101	93	320*	-2	258	261	114
0	231	256	110		h, 2, 3			3	142	111	178	0	105	16	319*
2	143	172	180	-10	269	261	92	5	29	37	1209*		h, 3, 4		
4	63	17	516*	-8	123	131	159		h, 8, 3			-5	28	14	1932*

Page 4

Columns are 10Fo 10Fc 100Sig, * for Insignificant

h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h,	3,	4	-1	113	69	349*	-4	73	47	396*		h,	5,	4
-3	169	177	153		h,	4,	4	-2	27	77	2504*	-3	164	167	239

I-768-m11

Page 1

Table F2 Observed and calculated structure factor amplitudes for [1,3-Se][I]

Columns are 10Fo				10Fc				100Sig, * for Insignificant							
1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig
	0,	0,	1	2	336	344	435	1	1785	1770	183	0	44	152	8630*
2	1618	1573	152	4	239	204	788*	3	63	28	3876*	2	1558	1658	173
4	3438	3285	195	6	261	163	586*	5	1319	1416	160	4	1359	1486	144
6	2169	2041	180	8	210	127	831*	7	1094	1144	193	6	765	774	151
8	1844	1762	217	10	94	140	4494*	9	143	153	1288*	8	823	873	197
10	727	676	219		1,	4,	1	11	684	705	314	10	721	737	245
12	2400	2266	286	1	345	218	589*		3,	3,	1	12	272	113	560*
14	630	633	315	3	93	204	4718*	0	184	1	3135*	14	377	339	528
	0,	1,	1		2,	0,	1	2	244	186	773*		5,	2,	1
1	2814	3038	191	2	1274	1234	118	4	79	160	4359*	1	497	456	251
3	714	772	125	4	2710	2578	201	6	83	62	2414*	3	1101	1188	149
5	2029	2011	182	6	581	537	155	8	88	78	4360*	5	732	784	213
7	1140	1210	141	8	1841	1764	181	10	94	146	2124*	7	598	575	248
9	391	402	319	10	250	261	674*		3,	4,	1	9	587	589	290
11	889	818	218	12	955	962	231	1	454	437	522	11	248	240	883*
13	550	509	356	14	92	287	4169*	3	230	23	1061*		5,	3,	1
	0,	2,	1		2,	1,	1		4,	0,	1	0	151	95	3954*
0	1143	1061	217	1	482	503	158	0	1119	1027	188	2	166	70	1178*
2	796	898	156	3	1063	1106	114	2	2817	2782	164	4	79	55	3769*
4	345	382	303	5	810	815	133	4	3120	3053	207	6	83	98	4569*
6	1082	1108	180	7	1179	1148	136	6	2942	2856	252	8	88	89	4158*
8	583	621	277	9	461	445	286	8	1772	1719	182	10	241	62	980*
10	409	434	395	11	297	365	667*	10	945	952	202		5,	4,	1
12	358	401	551	13	247	172	814*	12	536	488	330	1	269	188	807*
	0,	3,	1		2,	2,	1	14	578	561	358	3	93	301	5137*
1	1056	1239	216	0	681	646	291		4,	1,	1		6,	0,	1
3	93	245	3595*	2	489	501	205	1	2218	2084	217	0	1136	1096	186
5	945	1009	232	4	233	269	562*	3	1028	1060	114	2	2903	2803	186
7	822	869	269	6	423	460	320	5	343	342	315	4	967	958	116
9	90	22	2678*	8	76	111	4131*	7	303	313	314	6	3587	3466	260
	0,	4,	1	10	83	148	3800*	9	488	503	295	8	1004	1032	153
0	218	460	3497*	12	253	187	730*	11	630	678	282	10	1147	1106	189
2	92	184	4951*		2,	3,	1	13	602	567	331	12	475	442	348
4	94	143	4413*	1	508	489	354		4,	2,	1	14	662	652	338
	1,	1,	1	3	318	343	603*	0	982	872	235		6,	1,	1
0	2604	2368	311	5	332	386	629*	2	638	678	185	1	1503	1419	158
2	1302	1562	145	7	365	359	633*	4	627	674	203	3	1046	1042	113
4	1038	1147	118	9	91	102	2544*	6	583	605	259	5	1124	1122	133
6	1169	1235	127		2,	4,	1	8	370	405	396	7	586	609	203
8	551	566	232	0	91	48	9156*	10	84	364	4620*	9	598	582	236
10	456	467	317	2	318	99	615*	12	373	387	497	11	487	526	356
12	696	709	282	4	221	122	1109*		4,	3,	1	13	504	499	382
14	392	342	478		3,	1,	1	1	908	838	240		6,	2,	1
	1,	2,	1	0	3936	3697	308	3	434	474	382	0	1122	1026	228
1	1424	1548	153	2	1200	1367	122	5	485	544	358	2	380	442	304
3	242	245	398	4	1117	1241	116	7	498	455	357	4	451	470	253
5	789	845	195	6	2152	2307	199	9	412	374	464	6	651	648	240
7	611	647	268	8	977	1063	176		4,	4,	1	8	362	341	508
9	216	62	803*	10	526	571	313	0	92	165	7447*	10	235	177	851*
11	503	514	472	12	1099	1096	233	2	222	100	1127*	12	435	382	562
	1,	3,	1	14	429	469	470	4	287	130	864*		6,	3,	1
0	280	178	857*		3,	2,	1		5,	1,	1	1	832	758	261

Columns are 10Fo 10Fc 100Sig, * for Insignificant												Page 2			
1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig
6,	3,	1		4	801	834	214	13	92	59	2517*	11	283	310	593*
3	307	228	639*	6	287	163	451	10,	2,	1		13	94	340	4527*
5	715	754	271	8	620	616	269	0	154	220	2712*	12,	2,	1	
7	540	599	375	10	501	463	367	2	734	649	195	0	92	62	5171*
9	92	113	4757*	12	93	28	4280*	4	589	559	248	2	546	558	293
6,	4,	1		8,	3,	1		6	511	474	293	4	291	300	625*
0	218	133	1515*	1	482	392	385	8	230	357	860*	6	216	143	837*
2	96	101	2787*	3	959	961	242	10	426	397	438	8	161	118	1199*
7,	1,	1		5	593	590	332	12	94	167	2754*	10	353	271	488
0	1727	1584	257	7	308	416	812*	10,	3,	1		12,	3,	1	
2	1369	1415	154	9	632	621	340	1	474	385	410	1	424	381	477
4	1549	1655	172	8,	4,	1		3	694	661	292	3	584	565	346
6	1144	1194	136	0	93	42	8178*	5	388	358	454	5	85	157	4666*
8	1042	1114	180	2	229	140	967*	7	279	355	873*	7	156	181	1527*
10	883	889	214	9,	1,	1		9	520	429	398	13,	1,	1	
12	628	650	306	0	1090	1045	179	10,	4,	1		0	153	126	837*
7,	2,	1		2	750	751	145	0	94	63	8994*	2	903	885	156
1	859	786	180	4	1037	1058	133	11,	1,	1		4	1024	1053	154
3	958	980	164	6	690	692	177	0	54	269	5851*	6	210	176	550*
5	825	884	205	8	677	701	235	2	2394	2311	198	8	566	598	287
7	682	712	253	10	421	421	456	4	2322	2392	209	10	490	444	477
9	725	746	263	12	401	361	449	6	83	89	2957*	12	90	144	4457*
11	374	418	680*	9,	2,	1		8	1643	1686	179	13,	2,	1	
7,	3,	1		1	580	566	245	10	1241	1252	204	1	449	405	349
0	77	141	8008*	3	637	654	249	12	189	52	1167*	3	753	748	236
2	243	235	689*	5	570	620	268	11,	2,	1		5	297	185	470
4	175	87	1090*	7	453	492	353	1	1101	1002	176	7	79	90	2381*
6	84	113	4546*	9	377	433	436	3	1767	1740	183	9	465	433	369
8	89	67	2049*	11	158	228	1500*	5	1030	1002	199	11	92	264	5052*
7,	4,	1		9,	3,	1		7	873	876	231	13,	3,	1	
1	356	310	661*	0	153	105	3552*	9	1164	1146	216	0			

Columns are 10Fo												10Fc	100Sig, *	for Insignificant											
1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig										
14,	2,	1		10	92	161	4543*	0	1479	1486	257	7	374	446	713*										
2	910	856	215		16,	3,	1	2	909	869	211	9	362	213	675*										
4	858	800	224	1	85	416	5624*	4	499	471	305		21,	3,	1										
6	154	86	1042*	3	301	306	861*	6	1047	1099	220	0	91	42	3417*										
8	600	569	304	5	305	349	660*	8	448	490	381	2	91	119	5028*										
10	486	514	390	7	336	254	759*	10	342	324	536	4	246	101	1040*										
14,	3,	1			17,	1,	1		19,	2,	1		22,	0,	1										
1	568	480	349	0	65	66	5259*	1	992	969	235	0	1634	1659	247										
3	969	955	262	2	1679	1692	191	3	196	186	1023*	2	1790	1788	197										
5	558	524	399	4	1229	1221	184	5	603	593	327	4	709	695	255										
7	384	366	490	6	343	318	387	7	611	527	318	6	2280	2252	233										
15,	1,	1		8	753	823	262	9	287	184	636*	8	589	616	328										
0	862	825	234	10	809	832	275		19,	3,	1	10	743	766	312										
2	1207	1172	149	12	94	56	2586*	0	238	64	2882*		22,	1,	1										
4	1073	1112	162		17,	2,	1	2	89	83	2260*	1	1183	1243	216										
6	477	458	298	1	623	577	299	4	91	44	5178*	3	492	517	339										
8	831	815	225	3	1130	1148	221	6	94	53	4839*	5	633	652	290										
10	684	686	279	5	624	589	275		20,	0,	1	7	413	481	462										
12	442	377	536	7	437	452	402	0	222	395	916*	9	295	316	796*										
15,	2,	1		9	578	585	380	2	2253	2193	256		22,	2,	1										
1	396	442	558		17,	3,	1	4	267	206	636*	0	591	580	493										
3	906	895	222	0	86	71	3163*	6	1120	1100	202	2	357	403	537										
5	458	467	347	2	139	42	1755*	8	143	161	2356*	4	432	232	526										
7	408	415	409	4	89	74	4900*	10	1011	1000	260	6	475	452	425										
9	600	638	351	6	92	100	4463*		20,	1,	1	8	250	313	815*										
11	94	183	2814*		18,	0,	1	1	650	655	264		22,	3,	1										
15,	3,	1		0	2583	2543	326	3	742	754	251	1	672	623	378										
0	190	61	1387*	2	2181	2101	241	5	576	590	295	3	93	78	5210*										
2	84	154	3166*	4	974	984	184	7	379	464	453		23,	1,	1										
4	86	71	2889*	6	157	104	824*	9	476	517	510	0	954	979	319										
6	90	75	2815*	8	727	720	253	11	203	200	1171*	2	539	532	312										
16,	0,	1		10	917	952	259		20,	2,	1	4	490	513	356										
0	2532	2414	303	12	923	929	273	0	169	210	1363*	6	347	391	656*										
2	60	279	2131*		18,	1,	1	2	304	329	583*	8	412	420	444										
4	2082	2006	233	1	236	346	763*	4	345	334	643*	10	262	196	1008*										
6	69	147	4097*	3	816	806	216	6	85	69	2585*		23,	2,	1										
8	1301	1323	190	5	845	852	217	8	90	275	4887*	1	676	688	310										
10	384	214	500	7	713	727	254		20,	3,	1	3	379	420	510										
12	777	718	291	9	522	484	321	1	271	315	1022*	5	438	410	463										
16,	1,	1		11	91	225	4494*	3	519	441	393	7	92	316	4822*										
1	807	785	181		18,	2,	1	5	323	179	840*		23,	3,	1										
3	725	715	192	0	365	384	659*		21,	1,	1	0	256	177	1132*										
5	735	713	225	2	545	490	323	0	788	831	358	2	134	213	1992*										
7	723	734	244	4	481	492	359	2	795	811	243		24,	0,	1										
9	322	268	453	6	453	439	385	4	699	726	253	0	362	452	645*										
11	359	317	482	8	424	412	554	6	882	906	236	2	909	940	237										
16,	2,	1		10	94	249	5104*	8	532	529	358	4	674	684	277										
0	72	415	7612*		18,	3,	1	10	308	333	783*	6	1399	1409	210										
2	358	335	459	1	548	471	399		21,	2,	1	8	666	671	311										
4	331	227	444	3	460	479	632	1	714	721	290	10	429	437	615										
6	379	337	412	5	91	334	5619*	3	81	246	5099*		24,	1,	1										
8	241	161	937*		19,	1,	1	5	485	432	383	1	730	772	277										

I-7608-m14

Page 4

Columns are 10Fo 10Fc 100Sig, * for Insignificant											
1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig	1	kFo	Fc	Sig
24,	1,	1		2	795	781	244	3	91	237	4795*
3	385	349	427	4	856	869	258	5	94	244	4902*
5	399	454	596	6	316	206	701*		28,	0,	1
7	302	215	762*	8	639	670	345	0	1837	1889	292
9	182	290	1371*		26,	1,	1	2	538	558	361
	24,	2,	1	1	221	256	981*	4	1060	1047	258
0	447	514	672	3	406	398	417	6	578	608	368
2	85	134	4729*	5	562	554	362	8	723	709	327
4	87	246	2684*	7	488	557	434		28,	1,	1
6	91	225	3034*		26,	2,	1	1	457	443	423
	25,	1,	1	0	255	298	1119*	3	193	350	1337*
0	1412	1467	305	2	89	143	4687*	5	582	606	386
2	552	544	344	4	190	224	1356*	7	494	552	592
4	590	578	334	6	136	283	1996*		28,	2,	1
6	971	1030	265		27,	1,	1	0	235	391	1276*
8	594	598	361	0	489	448	567	2	233	242	1065*
	25,	2,	1	2	287	233	752*	4	363	166	715*
1	601	658	385	4	340	427	757*		29,	1,	1
3	88	138	4824*	6	90	278	4630*	0	398	369	679*
5	755	744	317	8	345	308	753*	2	414	397	571
	26,	0,	1		27,	2,	1	4	484	542	429
0	1470	1464	290	1	90	200	2904*	6	608	618	391
								3	144	376	3341*

I-768-m15

Table F3 Observed and calculated structure factor amplitudes for [1,4-Se] [I] [I3]

Columns are				1Fo	1Fc	10Sig,	* for Insignificant								
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
h, 0, 0				2	290	279	16	h, 13, 0				6	187	175	21
2	190	175	17	4	55	60	24	1	134	136	21	8	10	6	578*
4	319	320	30	6	54	55	31	3	92	93	26	10	109	100	36
6	314	327	27	8	237	244	18	5	132	138	23	12	39	35	128*
8	169	170	22	10	41	45	62	7	27	4	101*	14	14	19	659*
10	222	229	26	12	85	93	36	9	14	9	430*	h, 3, 1			
12	22	15	202*	14	68	72	52	h, 14, 0				14	33	291*	
14	17	9	295*	h, 7, 0				0	271	226	29	-13	62	59	60
h, 1, 0				1	203	198	15	2	12	8	278*	-11	69	71	47
1	242	230	13	3	421	405	24	4	47	48	64	-9	108	119	30
3	122	125	13	5	85	81	20	6	101	100	29	-7	57	61	36
5	358	370	27	7	176	179	17	8	67	74	45	-5	162	168	17
7	42	39	36	9	93	102	27	h, 15, 0				-3	163	160	18
9	68	63	41	11	60	53	41	1	13	4	414*	-1	102	104	15
11	158	168	22	13	85	76	37	3	13	23	245*	1	928	795	22
13	13	23	320*	h, 8, 0				5	83	91	35	3	64	64	26
h, 2, 0				0	438	363	34	7	33	8	104*	5	216	211	22
0	99	126	11	2	380	370	25	h, 16, 0				7	104	102	28
2	5	4	339*	4	19	8	95*	0	77	69	50	9	65	63	49
4	40	37	27	6	34	30	67*	2	47	47	61	11	77	71	63
6	182	186	16	8	187	195	21	4	14	21	245*	13	20	46	483*
8	66	66	27	10	37	33	106*	6	34	35	130*	h, 4, 1			
10	96	97	26	12	80	80	37	h, 17, 0				14	22	664*	
12	49	51	57	h, 9, 0				1	41	42	73*	-12	69	70	55
14	39	9	85*	1	132	133	16	3	14	4	253*	-10	11	28	610*
h, 3, 0				3	176	169	15	h, 1, 1				-8	97	107	30
1	61	66	14	5	12	23	344*	-15	14	20	669*	-6	164	164	18
3	7	11	196*	7	65	62	32	-13	13	27	649*	-4	72	68	24
5	35	39	44	9	81	87	31	-11	30	15	132*	-2	314	310	26
7	87	89	21	11	42	30	79*	-9	116	119	30	0	274	267	26
9	61	58	38	h, 10, 0				-7	71	76	33	2	275	264	29
11	82	88	32	0	181	159	21	-5	132	136	18	4	260	255	24
13	29	18	97*	2	66	60	26	-3	93	91	17	6	78	80	31
h, 4, 0				4	87	80	23	-1	57	59	18	8	136	128	27
0	534	451	23	6	17	11	148*	1	181	194	17	10	75	69	48
2	45	50	22	8	34	39	86*	3	60	55	29	12	38	23	96*
4	8	16	153*	10	27	30	102*	5	39	37	49	14	19	34	599*
6	50	54	34	12	14	14	319*	7	59	59	41	h, 5, 1			
8	47	51	37	h, 11, 0				9	11	32	583*	-13	69	50	83
10	24	19	138*	1	116	115	20	11	72	65	51	-11	130	139	32
12	32	30	90*	3	16	1	141*	13	13	8	700*	-9	48	50	58
14	47	51	85*	5	20	29	98*	h, 2, 1				-7	225	234	23
h, 5, 0				7	42	48	73*	-14	65	68	64	-5	9	4	479*
1	147	144	11	9	58	55	43	-12	12	9	632*	-3	8	19	258*
3	231	216	16	11	46	42	68	-10	92	91	38	-1	364	344	27
5	24	28	70*	h, 12, 0				-8	108	114	28	1	606	508	27
7	55	54	33	0	215	189	23	-6	31	33	59*	3	353	337	32
9	107	111	23	2	91	92	25	-4	266	266	24	5	58	62	36
11	64	62	39	4	12	25	211*	-2	20	29	78*	7	35	32	90*
13	53	52	55	6	77	76	32	0	81	74	15	9	139	135	30
h, 6, 0				8	39	48	81*	2	27	21	51*	11	12	19	651*
0	54	72	30	10	22	29	164*	4	21	22	192*	13	78	86	62

Page 2

Columns are 1Fo 1Fc 10Sig, * for Insignificant															
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
h, 6, 1				1	148	135	21	3	126	126	32	h, 1, 2			
-14	14	17	275*	3	61	59	40	5	62	75	77	-15	14	58	401*
-12	59	65	64	5	26	20	130*	7	51	39	91*	-13	108	121	42
-10	12	19	319*	7	40	41	94*	9	19	35	281*	-11	55	59	61
-8	14	38	397*	9	49	42	86*	h, 14, 1				-9	228	247	24
-6	149	149	21	11	25	4	189*	-8	14	14	623*	-7	90	92	27
-4	79	76	26	h, 10, 1				-6	13	20	353*	-5	34	33	63*
-2	256	245	23	-12	32	14	155*	-4	44	63	79*	-3	437	426	27
0	181	179	19	-10	13	53	604*	-2	48	51	68	-1	129	126	16
2	106	111	20	-8	58	52	51	0	87	92	42	1	189	195	19
4	166	159	19	-6	70	71	55	2	84	84	42	3	180	182	19
6	73	74	36	-4	60	71	45	4	45	35	97*	5	80	72	27
8	114	109	32	-2	82	73	30	6	46	59	115*	7	233	225	28
10	41	12	93*	0	168	170	21	8	14	12	654*	9	54	46	57
12	13	0	661*	2	191	187	21	h, 15, 1				11	26	30	178*
h, 7, 1				4	30	57	234*	-7	14	8	346*	13	100	92	46
-13	22	4	206*	6	85	84	38	-5	13	14	623*	h, 2, 2			
-11	24	25	325*	8	66	62	52	-3	31	13	107*	-14	57	71	98*
-9	11	18	326*	10	26	26	331*	-1	54	56	63	-12	40	3	87*
-7	48	47	67	12	43	45	100*	1	31	41	157*	-10	41	44	98*
-5	9	6	481*	h, 11, 1				3	69	64	55	-8	146	156	24
-3	9	15	248*	-11	14	10	618*	5	14	26	636*	-6	77	75	27
-1	8	8	422*	-9	90	100	43	7	36	11	138*	-4	194	193	20
1	242	215	24	-7	37	43	107*	h, 16, 1				-2	183	186	19
3	9	16	260*	-5	104	106	33	-6	14	2	576*	0	58	54	26
5	52	44	44	-3	81	78	36	-4	14	50	674*	2	65	86	26
7	11	1	567*	-1	62	70	56	-2	14	31	656*	4	42	45	55
9	42	33	100*	1	193	150	22	0	71	72	56	6	60	58	37
11	13	10	624*	3	76	74	39	2	14	32	370*	8	148	139	27
13	14	13	682*	5	54	54	57	4	14	1	362*	10	54	46	60
h, 8, 1				7	97	93	40	6	22	42	243*	12	49	45	80
-12	45	10	96*	9	25	29	188*	h, 17, 1				14	14	38	740*
-10	25	0	123*	11	62	64	72	-3	14	5	563*	h, 3, 2			
-8	17	16	364*	h, 12, 1				-1	67	70	60	-15	14	42	661*
-6	55	59	47	-10	68	74	64	1	14	10	547*	-13	13	5	578*
-4	10	20	498*	-8	49	51	87*	3	19	57	300*	-11	12	6	612*
-2	114	110	22	-6	24	16	164*	h, 0, 2				-9	71	66	41
0	184	182	20	-4	161	161	27	-14	108	120	62	-7	21	9	88*
2	115	111	22	-2	37	47	74*	-12	12	13	947*	-5	45	43	36
4	56	45	42	0	11	18	538*	-10	11	2	847*	-3	71	81	24
6	32	32	79*	2	11	36	577*	-8	334	355	44	-1	79	78	21
8	56	52	55	4	48	38	76	-6	281	279	37	1	178	178	20
10	19	9	234*	6	106	108	37	-4	407	400	39	3	79	78	24
12	14	17	639*	8	13	13	626*	-2	244	234	26	5	84	74	27
h, 9, 1				10	14	43	655*	0	146	142	22	7	28	22	106*
-13	46	17	87*	h, 13, 1				2	1360	1248	38	9	72	79	48
-11	71	69	54	-9	87	88	50	4	109	107	31	11	60	63	62
-9	15	6	243*	-7	67	64	50	6	254	254	42	13	58	67	74
-7	92	92	34	-5	84	80	42	8	218	199	36	h, 4, 2			
-5	28	20	116*	-3	66	67	48	10	65	67	70	-14	14	25	359*
-3	33	46	87*	-1	124	123	30	12	120	105	55	-12	60	53	59
-1	49	46	42	1	239	211	25	14	14	23	1100*	-10	11	14	570*

Columns are				1Fo				1Fc				10Sig, *				for Insignificant			
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
h, 4, 2				5	297	290	30	-1	56	51	48	0	58	46	63				
-8	29	14	103*	7	11	13	584*	1	171	172	24	2	32	62	290*				
-6	28	34	79*	9	100	102	39	3	40	24	68*	4	47	31	110*				
-4	8	21	440*	11	63	69	66	5	51	48	59	h, 17, 2							
-2	7	14	243*	13	14	25	674*	7	13	28	618*	-3	14	13	609*				
0	108	106	17	h, 8, 2				9	55	46	68	-1	14	4	275*				
2	426	368	30	-12	83	87	48	h, 12, 2				1	14	18	646*				
4	8	12	467*	-10	113	127	36	-10	37	16	102*	3	60	57	70				
6	22	26	126*	-8	68	72	44	-8	44	48	100*	h, 1, 3							
8	72	77	43	-6	262	264	26	-6	31	49	135*	-15	14	12	653*				
10	52	45	61	-4	54	57	42	-4	79	72	39	-13	13	47	641*				
12	13	12	596*	-2	37	42	52	-2	61	57	47	-11	21	17	321*				
h, 5, 2				0	333	331	26	0	100	104	34	-9	11	6	345*				
-13	13	10	329*	2	350	295	27	2	192	171	25	-7	146	142	23				
-11	76	80	44	4	277	276	31	4	38	55	109*	-5	113	105	19				
-9	62	62	47	6	11	7	544*	6	13	4	591*	-3	183	188	21				
-7	97	101	27	8	26	9	144*	8	50	60	100*	-1	104	108	20				
-5	112	119	22	10	101	104	43	10	14	34	653*	1	7	6	219*				
-3	8	11	430*	12	14	2	656*	h, 13, 2				3	136	134	20				
-1	214	201	22	h, 9, 2				-9	88	101	48	5	9	18	525*				
1	56	55	28	-13	18	15	204*	-7	24	15	182*	7	10	3	578*				
3	166	158	19	-11	66	71	57	-5	12	7	551*	9	12	19	644*				
5	172	174	20	-9	21	28	182*	-3	140	142	28	11	33	8	133*				
7	10	28	580*	-7	77	82	41	-1	98	103	36	13	38	25	134*				
9	12	13	545*	-5	105	109	30	1	119	122	33	h, 2, 3							
11	89	83	45	-3	15	6	145*	3	107	106	36	-14	62	34	64				
13	48	44	119*	-1	175	168	20	5	52	58	69	-12	97	103	41				
h, 6, 2				1	80	80	30	7	98	96	43	-10	11	18	565*				
-14	26	23	197*	3	130	130	25	9	14	12	625*	-8	169	164	22				
-12	100	101	39	5	128	128	28	h, 14, 2				-6	71	72	28				
-10	138	150	30	7	29	21	131*	-8	114	115	40	-4	94	95	21				
-8	85	87	33	9	13	21	576*	-6	99	108	43	-2	244	253	23				
-6	317	325	27	11	62	67	67	-4	110	112	37	0	41	37	38				
-4	52	57	40	h, 10, 2				-2	13	43	572*	2	124	124	19				
-2	8	3	251*	-12	34	41	116*	0	12	7	556*	4	56	50	43				
0	284	282	23	-10	13	2	636*	2	225	189	26	6	56	48	43				
2	62	68	30	-8	24	31	128*	4	15	9	284*	8	90	81	37				
4	183	185	19	-6	43	31	61	6	32	35	138*	10	31	6	139*				
6	92	90	32	-4	35	49	96*	8	68	68	82	12	57	61	74				
8	46	40	62	-2	13	10	173*	h, 15, 2				h, 3, 3							
10	132	139	35	0	20	5	134*	-7	38	17	120*	-13	60	60	78				
12	30	8	129*	2	141	132	26	-5	15	4	288*	-11	54	66	57				
h, 7, 2				4	75	70	40	-3	105	114	40	-9	92	101	34				
-13	25	20	145*	6	100	105	35	-1	13	17	537*	-7	148	144	20				
-11	142	147	32	8	13	39	582*	1	13	4	630*	-5	40	49	56				
-9	95	94	36	10	41	36	118*	3	13	3	570*	-3	182	187	19				
-7	134	138	25	h, 11, 2				5	14	17	271*	-1	42	43	37				
-5	213	212	22	-11	14	5	544*	7	16	49	358*	1	110	115	19				
-3	136	138	20	-9	29	22	143*	h, 16, 2				3	575	495	34				
-1	398	394	34	-7	12	22	554*	-6	14	12	616*	5	41	40	66				
1	170	165	19	-5	32	16	86*	-4	14	44	600*	7	169	166	24				
3	165	160	20	-3	11	1	510*	-2	14	34	573*	9	58	48	57				

Page 4

Columns are 1Fo 1Fc 10Sig, * for Insignificant															
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
h, 3, 3				-7	11	22	509*	-9	13	11	319*	0	14	42	604*
11 53 46 94*				-5	54	54	42	-7	119	119	33	2	86	83	49
13 40 33 106*				-3	9	12	487*	-5	50	51	58	4	42	4	118*
h, 4, 3				-1	9	19	257*	-3	94	89	33	h, 17, 3			
-14 55 51 99*				1	9	4	466*	-1	83	82	37	-1	41	24	117*
-12 33 30 120*				3	160	154	22	1	51	48	55	1	52	68	107*
-10 111 106 32				5	11	14	528*	3	145	111	27	h, 0, 4			
-8 32 21 76*				7	56	49	54	5	61	58	52	-14	41	63	148*
-6 138 138 20				9	33	5	96*	7	13	26	573*	-12	183	183	42
-4 150 150 18				11	14	21	693*	9	72	62	57	-10	11	7	372*
-2 29 35 72*				h, 8, 3				h, 12, 3				-8	20	2	176*
0 235 241 24				-12	14	3	302*	-10	48	39	79	-6	386	380	50
2 169 172 19				-10	27	33	149*	-8	107	106	37	-4	275	271	35
4 175 175 20				-8	45	37	62	-6	35	37	115*	-2	320	323	35
6 163 156 24				-6	62	58	42	-4	12	5	323*	0	87	91	35
8 62 66 52				-4	42	36	67	-2	158	166	27	2	67	61	45
10 80 75 50				-2	10	21	477*	0	12	33	542*	4	752	651	57
12 14 40 686*				0	137	133	22	2	28	5	131*	6	10	23	809*
h, 5, 3				2	168	167	21	4	12	37	336*	8	139	143	41
-13 13 6 576*				4	12	26	472*	6	13	20	588*	10	105	102	55
-11 90 83 40				6	34	5	103*	8	54	51	96*	12	22	17	549*
-9 162 165 25				8	12	17	608*	h, 13, 3				h, 1, 4			
-7 65 62 37				10	13	32	644*	-9	14	22	329*	-13	57	67	71
-5 279 278 26				h, 9, 3				-7	103	104	41	-11	172	170	28
-3 23 36 77*				-13	14	9	580*	-5	70	77	50	-9	84	86	39
-1 117 119 19				-11	68	43	68	-3	101	110	38	-7	282	277	29
1 216 219 23				-9	76	69	43	-1	29	38	131*	-5	95	98	24
3 347 313 31				-7	20	5	180*	1	75	74	45	-3	11	29	214*
5 217 218 24				-5	127	126	25	3	167	155	29	-1	312	319	25
7 72 69 42				-3	29	8	100*	5	78	81	49	1	62	65	41
9 49 32 84*				-1	72	71	33	7	44	54	117*	3	110	109	24
11 63 57 63				1	10	11	479*	h, 14, 3				5	121	118	27
13 14 2 717*				3	136	123	27	-8	14	26	573*	7	25	31	143*
h, 6, 3				5	44	43	62	-6	43	19	100*	9	105	102	39
-14 14 36 638*				7	12	11	312*	-4	25	18	133*	11	44	43	113*
-12 14 31 309*				9	48	36	72	-2	48	45	66	h, 2, 4			
-10 110 106 31				11	14	11	629*	0	61	48	54	-14	14	8	674*
-8 42 56 82*				h, 10, 3				2	73	72	50	-12	78	87	66
-6 78 79 32				-12	50	42	97*	4	61	60	60	-10	44	25	68
-4 128 134 21				-10	44	31	75*	6	14	16	649*	-8	10	13	302*
-2 9 27 481*				-8	22	44	179*	h, 15, 3				-6	197	185	22
0 245 239 26				-6	78	87	41	-7	25	7	195*	-4	69	67	30
2 152 151 20				-4	49	51	70	-5	14	17	354*	-2	132	134	20
4 36 28 74*				-2	43	48	60	-3	13	40	604*	0	231	240	24
6 83 71 36				0	56	58	47	-1	37	6	90*	2	63	62	33
8 49 37 62				2	110	109	30	1	22	26	199*	4	24	32	191*
10 54 56 73				4	146	145	27	3	30	30	144*	6	54	51	68
12 14 6 707*				6	45	30	64	5	14	46	671*	8	67	69	51
h, 7, 3				8	70	72	53	h, 16, 3				10	87	81	45
-13 37 3 122*				10	45	39	111*	-6	14	2	527*	12	28	25	304*
-11 23 4 170*				h, 11, 3				-4	50	22	72	h, 3, 4			
-9 34 34 111*				-11	23	24	202*	-2	14	35	606*	-13	13	31	702*

Page 3															
Columns are				1Fo	1Fc	10Sig, * for Insignificant									
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 3,	4		4	60	57	44	4	82	78	38	3	17	12	301*
-11	32	21	121*	6	77	86	43	6	51	45	67		h, 16,	4	
-9	27	11	101*	8	76	76	48	8	75	80	55	-4	14	11	587*
-7	36	5	79*	10	43	25	102*	10	38	31	136*	-2	50	41	97*
-5	98	103	24		h, 7,	4			h, 11,	4		0	47	37	106*
-3	38	39	64*	-13	42	31	114*	-11	14	9	584*	2	45	31	86*
-1	106	113	22	-11	13	37	574*	-9	13	5	255*		h, 1,	5	
1	96	95	23	-9	200	196	25	-7	22	16	187*	-13	14	22	678*
3	164	163	21	-7	129	121	28	-5	12	31	528*	-11	67	75	76
5	108	115	28	-5	150	152	23	-3	23	35	280*	-9	11	13	548*
7	77	76	43	-3	170	174	21	-1	52	40	53	-7	25	22	125*
9	27	15	156*	-1	124	126	24	1	63	64	48	-5	108	105	26
11	46	50	109*	1	254	258	28	3	151	151	28	-3	82	85	29
	h, 4,	4		3	113	112	27	5	28	27	115*	-1	153	151	22
-14	39	12	98*	5	86	92	38	7	29	56	294*	1	79	84	33
-12	13	9	255*	7	164	162	29	9	21	16	239*	3	16	27	198*
-10	12	17	306*	9	41	29	85*		h, 12,	4		5	79	78	39
-8	31	37	81*	11	20	40	274*	-10	14	11	618*	7	12	5	330*
-6	10	20	500*		h, 8,	4		-8	18	7	194*	9	28	13	155*
-4	24	16	104*	-12	42	37	85*	-6	62	63	56	11	14	7	588*
-2	73	78	30	-10	109	108	36	-4	12	42	587*		h, 2,	5	
0	46	39	39	-8	140	149	28	-2	52	51	58	-14	14	11	615*
2	121	125	23	-6	87	80	34	0	64	70	50	-12	54	59	70
4	253	229	29	-4	240	249	25	2	84	84	41	-10	108	107	34
6	25	3	140*	-2	54	56	45	4	130	126	35	-8	43	33	77*
8	19	17	207*	0	65	60	37	6	13	21	575*	-6	197	193	22
10	46	53	109*	2	203	209	22	8	14	4	335*	-4	22	9	99*
12	39	24	129*	4	173	164	25		h, 13,	4		-2	125	127	24
	h, 5,	4		6	137	143	31	-9	34	50	157*	0	146	153	23
-13	55	10	84	8	13	4	329*	-7	105	112	40	2	10	10	526*
-11	28	4	135*	10	20	3	244*	-5	13	21	320*	4	93	91	33
-9	98	91	33		h, 9,	4		-3	13	6	534*	6	11	42	341*
-7	37	39	91*	-11	14	6	319*	-1	97	103	38	8	46	40	72
-5	39	47	68*	-9	87	84	39	1	71	79	50	10	13	27	688*
-3	156	160	19	-7	19	14	182*	3	78	75	47		h, 3,	5	
-1	9	7	482*	-5	26	49	147*	5	58	62	66	-13	50	28	74
1	136	140	22	-3	129	127	26	7	14	25	607*	-11	79	83	46
3	19	16	262*	-1	11	19	524*		h, 14,	4		-9	61	53	45
5	114	115	29	1	124	123	28	-8	14	1	605*	-7	114	122	30
7	106	110	35	3	11	17	532*	-6	120	123	38	-5	120	119	25
9	35	14	100*	5	86	93	38	-4	98	108	41	-3	39	46	56
11	14	3	640*	7	63	75	61	-2	83	90	47	-1	132	143	23
	h, 6,	4		9	14	8	600*	0	40	29	105*	1	45	26	62
-14	100	105	47		h, 10,	4		2	13	4	329*	3	89	92	33
-12	40	41	114*	-12	14	6	657*	4	137	113	36	5	264	248	28
-10	125	119	31	-10	36	20	119*	6	14	21	593*	7	25	33	129*
-8	176	181	25	-8	35	31	90*		h, 15,	4		9	90	93	46
-6	99	100	30	-6	12	10	519*	-7	76	77	57	11	14	20	396*
-4	300	313	28	-4	14	24	258*	-5	22	14	207*		h, 4,	5	
-2	25	31	100*	-2	78	90	41	-3	14	4	334*	-14	55	64	76
0	9	36	497*	0	47	51	59	-1	96	98	43	-12	60	56	61
2	183	198	22	2	47	44	59	1	25	6	191*	-10	23	37	129*

Page 6															
Columns are				1Fo	1Fc	10Sig, * for Insignificant									
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
h, 4, 5				-12	14	3	333*	4	24	4	197*	-8	30	47	101*
-8	118	116	30	-10	13	1	556*	6	25	27	152*	-6	13	21	285*
-6	40	11	59	-8	12	45	597*	h, 13, 5				-4	165	164	24
-4	135	136	23	-6	67	67	45	-7	14	10	613*	-2	32	50	100*
-2	97	103	27	-4	77	82	39	-5	81	82	47	0	53	61	56
0	10	17	309*	-2	11	2	546*	-3	48	61	76	2	189	195	24
2	126	137	29	0	55	51	64	-1	93	97	44	4	53	46	56
4	88	90	37	2	93	101	35	1	13	14	344*	6	12	5	588*
6	82	91	43	4	98	104	38	3	14	26	658*	8	13	33	622*
8	83	81	49	6	17	11	241*	5	90	88	45	10	55	47	75
10	56	43	89	8	13	19	596*	h, 14, 5				h, 3, 6			
h, 5, 5				10	14	3	662*	-6	16	21	510*	-13	23	17	203*
-13	110	110	41	h, 9, 5				-4	14	19	356*	-11	13	5	618*
-11	13	26	587*	-11	14	11	573*	-2	14	11	573*	-9	54	48	70
-9	117	114	31	-9	75	76	47	0	14	17	359*	-7	11	14	577*
-7	134	136	27	-7	43	36	73*	2	19	33	260*	-5	48	43	59
-5	27	31	93*	-5	18	15	160*	4	14	38	363*	-3	142	140	25
-3	210	216	22	-3	101	105	33	h, 15, 5				-1	79	84	37
-1	10	37	520*	-1	28	15	122*	-5	14	2	621*	1	103	103	31
1	137	140	24	1	62	64	60	-3	14	16	593*	3	62	65	66
3	92	99	33	3	21	13	176*	-1	18	47	483*	5	101	103	36
5	135	138	30	5	106	94	37	1	26	16	184*	7	75	79	50
7	100	99	39	7	27	19	152*	h, 0, 6				9	38	47	105*
9	41	43	92*	9	14	9	654*	-14	105	100	68	h, 4, 6			
11	33	15	120*	h, 10, 5				-12	94	83	60	-12	14	18	331*
h, 6, 5				-10	42	52	111*	-10	211	203	36	-10	13	13	558*
-12	26	33	321*	-8	40	39	85*	-8	15	6	242*	-8	48	35	72
-10	15	30	256*	-6	12	25	309*	-6	11	17	789*	-6	92	90	36
-8	115	115	32	-4	103	104	34	-4	281	277	46	-4	50	57	56
-6	72	78	52	-2	12	21	583*	-2	145	154	34	-2	24	12	221*
-4	90	96	32	0	40	32	89*	0	175	181	34	0	76	73	39
-2	72	74	38	2	12	26	312*	2	17	24	500*	2	36	34	79*
0	37	25	61	4	57	53	75	4	11	11	827*	4	92	94	38
2	152	157	25	6	86	83	46	6	297	292	45	6	116	120	36
4	78	80	41	8	29	14	277*	8	13	26	1011*	8	13	3	268*
6	12	3	610*	h, 11, 5				10	64	63	93	10	23	4	394*
8	45	24	106*	-9	30	26	146*	h, 1, 6				h, 5, 6			
10	14	10	381*	-7	13	14	340*	-13	42	16	112*	-13	63	54	61
h, 7, 5				-5	105	108	37	-11	63	67	74	-11	50	35	89*
-13	14	21	631*	-3	43	43	70	-9	173	174	26	-9	35	23	81*
-11	20	4	216*	-1	46	55	88*	-7	84	76	37	-7	84	80	39
-9	12	4	311*	1	63	66	54	-5	216	220	24	-5	11	11	559*
-7	35	32	86*	3	27	26	116*	-3	83	85	34	-3	19	8	157*
-5	32	19	77*	5	87	66	46	-1	10	22	553*	-1	140	142	26
-3	11	46	560*	7	45	40	115*	1	174	177	25	1	11	6	332*
-1	27	16	111*	h, 12, 5				3	30	12	115*	3	70	78	50
1	43	36	81*	-8	29	43	155*	5	50	33	62	5	43	35	70
3	30	10	110*	-6	106	111	39	7	70	61	51	7	51	67	95*
5	86	85	40	-4	17	15	225*	9	13	10	279*	9	47	53	88*
7	13	7	587*	-2	35	22	91*	h, 2, 6				h, 6, 6			
9	51	36	91*	0	117	123	35	-12	41	15	107*	-12	132	125	36
h, 8, 5				2	13	7	343*	-10	85	82	41	-10	36	48	127*

I-768-m21

Page 7

Page 7															
Columns are				1Fo	1Fc	10Sig, * for Insignificant									
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
h, 6, 6				2	42	64	107*	0	107	105	33	h, 7, 7			
-8	113	112	33	4	51	50	68	2	69	68	50	-11	14	19	362*
-6	157	163	27	6	27	36	138*	4	35	11	88*	-9	49	2	83*
-4	73	73	40	h, 11, 6				6	13	40	609*	-7	13	4	593*
-2	198	216	24	-9	14	9	354*	8	14	27	658*	-5	36	22	114*
0	11	3	296*	-7	14	7	574*	h, 3, 7				-3	12	14	572*
2	46	50	63	-5	40	39	101*	-11	40	27	116*	-1	19	29	215*
4	98	107	38	-3	57	63	74	-9	77	82	49	1	34	15	117*
6	49	41	70	-1	13	61	639*	-7	31	35	101*	3	13	36	637*
8	14	27	369*	1	45	58	79*	-5	109	111	34	5	13	9	631*
h, 7, 6				3	58	49	59	-3	71	66	45	7	14	40	697*
-11	36	26	133*	5	90	94	47	-1	52	45	57	h, 8, 7			
-9	49	34	65	h, 12, 6				1	71	80	47	-10	14	18	361*
-7	181	178	27	-8	32	8	143*	3	34	38	95*	-8	13	10	581*
-5	97	103	37	-6	14	30	347*	5	43	56	85*	-6	13	36	590*
-3	120	122	30	-4	49	62	97*	7	97	110	46	-4	63	62	53
-1	106	108	32	-2	14	32	565*	9	28	26	191*	-2	69	70	48
1	63	71	50	0	13	28	581*	h, 4, 7				0	25	20	128*
3	116	118	36	2	19	54	255*	-12	72	73	55	2	54	53	64
5	68	74	53	4	43	49	118*	-10	54	44	70	4	38	57	130*
7	43	40	85*	h, 13, 6				-8	46	41	86*	6	60	50	84
9	77	78	80	-7	27	49	185*	-6	94	89	37	h, 9, 7			
h, 8, 6				-5	93	91	44	-4	43	4	93*	-9	14	22	615*
-12	114	115	44	-3	41	24	90*	-2	91	100	38	-7	83	88	47
-10	59	45	73	-1	14	4	345*	0	58	59	56	-5	13	4	602*
-8	108	105	36	1	58	51	77	2	39	10	100*	-3	42	33	79*
-6	120	131	33	3	52	45	74	4	61	63	79	-1	56	56	62
-4	51	49	58	h, 14, 6				6	50	43	74	1	25	5	164*
-2	153	164	28	-4	87	92	51	8	17	40	306*	3	38	33	94*
0	40	25	64	-2	68	74	59	h, 5, 7				5	14	13	581*
2	51	46	58	0	40	46	124*	-11	114	106	39	h, 10, 7			
4	94	103	42	2	49	19	95*	-9	13	30	349*	-8	52	58	91*
6	44	66	111*	h, 1, 7				-7	107	112	36	-6	13	27	598*
8	53	52	80	-13	14	27	657*	-5	75	81	54	-4	13	10	545*
h, 9, 6				-11	39	18	116*	-3	12	13	571*	-2	80	87	49
-11	21	38	240*	-9	81	78	44	-1	109	111	36	0	13	4	562*
-9	13	6	555*	-7	12	37	327*	1	13	14	490*	2	22	17	200*
-7	65	73	72	-5	45	45	96*	3	100	97	37	4	38	3	121*
-5	12	5	329*	-3	44	46	91*	5	34	34	138*	h, 11, 7			
-3	29	11	97*	-1	38	46	97*	7	14	49	373*	-7	14	20	332*
-1	105	107	35	1	81	80	44	h, 6, 7				-5	14	14	354*
1	38	29	94*	3	44	59	97*	-12	69	60	58	-3	73	75	72
3	67	69	55	5	37	24	87*	-10	14	16	611*	-1	13	28	609*
5	13	14	600*	7	13	39	631*	-8	29	12	133*	1	31	23	150*
7	21	56	190*	9	14	7	365*	-6	85	82	43	3	14	44	675*
h, 10, 6				h, 2, 7				-4	60	61	52	h, 12, 7			
-10	14	20	664*	-12	14	13	339*	-2	70	72	46	-6	47	26	98*
-8	13	12	319*	-10	81	84	46	0	36	27	81*	-4	85	85	50
-6	63	61	55	-8	71	71	47	2	37	41	88*	-2	14	6	571*
-4	12	20	515*	-6	29	20	141*	4	75	77	52	0	14	28	654*
-2	12	22	574*	-4	152	150	28	6	29	28	156*	2	71	72	58
0	79	81	44	-2	20	19	194*	8	14	2	641*	h, 13, 7			

I-768-m22

Page 8

Page 8															
Columns are				1Fo	1Fc	10Sig, * for Insignificant									
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
h, 13, 7				-4	102	103	38	-4	62	67	63	h, 6, 9			
-5	21	5	247*	-2	59	62	76	-2	34	33	105*	-8	24	1	166*
-3	36	43	107*	0	12	9	318*	0	37	21	136*	-6	28	2	129*
-1	14	29	641*	2	43	41	110*	2	60	50	65	-4	49	38	77
1	44	59	97*	4	50	14	86*	h, 11, 8				-2	13	29	374*
h, 0, 8				6	26	46	162*	-5	14	1	623*	0	38	31	127*
-12	101	91	62	h, 5, 8				-3	40	33	123*	2	14	8	621*
-10	68	70	80	-11	43	35	118*	-1	45	54	86*	4	42	31	123*
-8	157	157	45	-9	14	52	678*	1	56	49	89	h, 7, 9			
-6	12	5	372*	-7	13	37	613*	h, 1, 9				-7	17	0	287*
-4	41	18	106*	-5	58	56	84	-9	14	2	642*	-5	31	7	162*
-2	154	145	43	-3	12	6	674*	-7	13	53	710*	-3	24	12	212*
0	39	49	124*	-1	31	30	141*	-5	39	40	92*	-1	22	7	225*
2	28	68	439*	1	90	91	44	-3	49	45	78	1	36	19	140*
4	13	6	841*	3	13	9	584*	-1	13	7	380*	3	14	11	293*
6	14	8	944*	5	48	35	83*	1	13	23	672*	h, 8, 9			
h, 1, 8				h, 6, 8				3	14	28	704*	-6	36	13	133*
-11	14	15	558*	-10	114	108	42	5	33	36	276*	-4	14	18	537*
-9	68	56	54	-8	14	35	588*	h, 2, 9				-2	56	38	97*
-7	133	131	34	-6	83	83	46	-10	47	23	97*	0	42	38	93*
-5	35	38	124*	-4	109	115	37	-8	85	83	50	2	14	17	626*
-3	121	122	35	-2	49	34	67	-6	32	28	248*	h, 9, 9			
-1	72	69	47	0	102	112	40	-4	33	3	105*	-5	65	72	88
1	12	15	633*	2	13	19	282*	-2	86	81	46	-3	19	11	504*
3	73	76	53	4	42	45	90*	0	13	13	624*	-1	43	35	125*
5	13	12	349*	6	41	47	141*	2	46	62	111*	h, 0, 10			
7	14	4	636*	h, 7, 8				4	14	26	370*	-8	35	40	170*
h, 2, 8				-9	14	13	631*	h, 3, 9				-6	97	84	63
-10	50	18	97*	-7	13	12	651*	-9	14	24	632*	-4	29	21	185*
-8	63	58	58	-5	109	107	41	-7	64	57	81	-2	14	4	1089*
-6	61	47	74	-3	46	59	76*	-5	57	28	62	0	62	64	96
-4	18	31	197*	-1	65	67	58	-3	77	74	55	2	14	1	895*
-2	107	112	38	1	56	56	82	-1	13	30	625*	h, 1, 10			
0	24	35	169*	3	26	28	143*	1	33	37	136*	-7	53	36	101*
2	12	18	622*	5	49	37	106*	3	14	34	711*	-5	83	77	52
4	118	118	38	h, 8, 8				5	35	26	149*	-3	14	7	355*
6	32	25	150*	-8	50	32	94*	h, 4, 9				-1	47	46	90*
h, 3, 8				-6	80	72	51	-8	47	26	121*	1	59	51	91
-11	54	44	96*	-4	85	93	45	-6	48	38	74	h, 2, 10			
-9	53	40	70	-2	35	14	116*	-4	43	46	90*	-6	59	31	69
-7	65	63	71	0	67	73	59	-2	15	0	573*	-4	42	27	101*
-5	18	4	178*	2	30	0	150*	0	30	57	163*	-2	19	20	467*
-3	57	45	57	4	14	23	566*	2	47	30	104*	0	32	53	170*
-1	105	109	38	h, 9, 8				4	14	6	688*	2	14	27	687*
1	68	71	52	-7	14	14	332*	h, 5, 9				h, 3, 10			
3	54	66	71	-5	59	48	65	-9	74	71	57	-7	57	47	104*
5	37	35	135*	-3	13	19	579*	-7	14	15	636*	-5	63	52	87
7	29	53	193*	-1	13	12	358*	-5	81	72	65	-3	14	2	373*
h, 4, 8				1	77	70	67	-3	29	45	164*	-1	37	30	138*
-10	14	30	679*	3	29	28	166*	-1	30	27	269*	1	45	58	98*
-8	13	21	630*	h, 10, 8				1	14	34	702*	h, 4, 10			
-6	53	62	85	-6	14	26	676*	3	14	2	387*	-6	14	12	665*

I-768-m23

Page 9

Columns are				1Fo	1Fc	10Sig, *	for Insignificant								
h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig	h	kFo	Fc	Sig
	h, 4, 10			0	50	47	101*	-3	14	30	618*	-4	56	52	76
-4	58	56	92		h, 5, 10			-1	19	8	217*	-2	68	68	61
-2	53	75	112*	-5	28	36	170*		h, 6, 10						